

**AUTOMATISCHE ERGEBNISBEURTEILUNG
IN CHROMELEON™ 7.2. REPORTS**



EINLEITUNG

Chromeleon 7.2 bietet bei der Gestaltung der Report Templates zahlreiche Möglichkeiten die Ergebnisbeurteilung gemessener Proben zu optimieren. Am Beispiel der Abweichung einer Peakfläche zu einer hinterlegten Sollfläche der Komponente soll dies dargestellt werden. Diese Sollwerte könnten zum Beispiel im Rahmen eines Musterchromatogramms ermittelt und in der SOP hinterlegt worden sein.

#1: ANFORDERUNG

Ein entscheidendes Kriterium bei Beurteilungen des Messergebnisses einer Probe ist es, ob sich der, in der Regel über die Peakfläche bestimmte Gehalt einer Komponente innerhalb der tolerierten Messwertschwankungen bewegt oder nicht. Dies soll in einem Report Template automatisiert erfasst und eindeutig ausgegeben werden. Beim automatisierten Abgleich der Ergebnisse mit definierten Spezifikationsgrenzen soll im Report Template angezeigt werden, ob sich die jeweilige Peakfläche der Komponente innerhalb der Spezifikationsgrenzen befindet (dargestellt als „OK“) oder nicht (dargestellt als „OOS“).

#2: UMSETZUNG

Die Umsetzung der gestellten Anforderungen geschieht in fünf Schritten:

- Erstellen einer Custom Variable für den Sollwert
- Erstellen einer Custom Variable für die tolerierte Abweichung (in %)
- Erstellen einer Custom Formula zur Berechnung der tatsächlichen Abweichung (in %)
- Erstellen einer Formel im Report zum Vergleich der beiden Abweichungen
- Ergebnisbeurteilung im Report

#3: ERSTELLEN DER CUSTOM VARIABLES

In einem ersten Schritt werden die erforderlichen Custom Variables angelegt.

Empfehlung: Das Anlegen von Custom Variables sollte stets auf Data Vault-Ebene erfolgen. Andernfalls besteht ein erhöhtes Risiko für Datenbank-Probleme bis hin zum Ausfall.

Werden Variablen in mehreren Schreibweisen (Variable; VARIABLE; variable) erstellt, unterscheiden sich jedoch ausschließlich durch unterschiedliche Groß- und Kleinschreibung, kommt es bei der Übertragung auf die Datenbank zu Verwechslungen, da die Datenbank alles in Großbuchstaben übersetzt. Diese Verwechslungen führen zu falscher Verwendung der Variablen bis hin zum kompletten Ausfall der Reports oder sogar der Datenbank selbst.

Im Hauptmenü unter Tools ist der Custom Variables Editor zu finden (Abbildung 1). Im Editor Fenster werden alle bestehenden Variablen aufgelistet (Abbildung 2).

Durch Klick auf „Add“ sollen die folgenden zwei Custom Variables angelegt werden:

- ▶ SOLLWERT
- ▶ ABWEICHUNG

Beim Anlegen der Custom Variables ist zu berücksichtigen, dass weder Sonderzeichen, noch Umlaute oder Leerzeichen verwendet werden, da die Variable zwar unter Verwendung der erwähnten Zeichen gespeichert werden könnte, jedoch im Report o. ä. nicht von Chromeleon verfügbar gemacht wird. Ebenso ist darauf zu achten, dass Name, Context oder Type der Custom Variable nach erstem Speichern nicht mehr veränderbar ist (im Gegensatz zu den weiteren Angaben zur Custom Variable wie Description oder Precision).

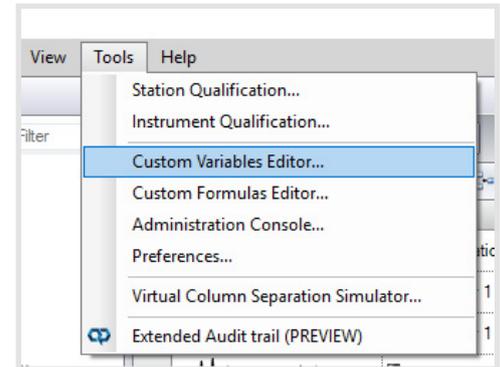


Abbildung 1: Öffnen des Custom Variables Editor in der Chromeleon™ Konsole.

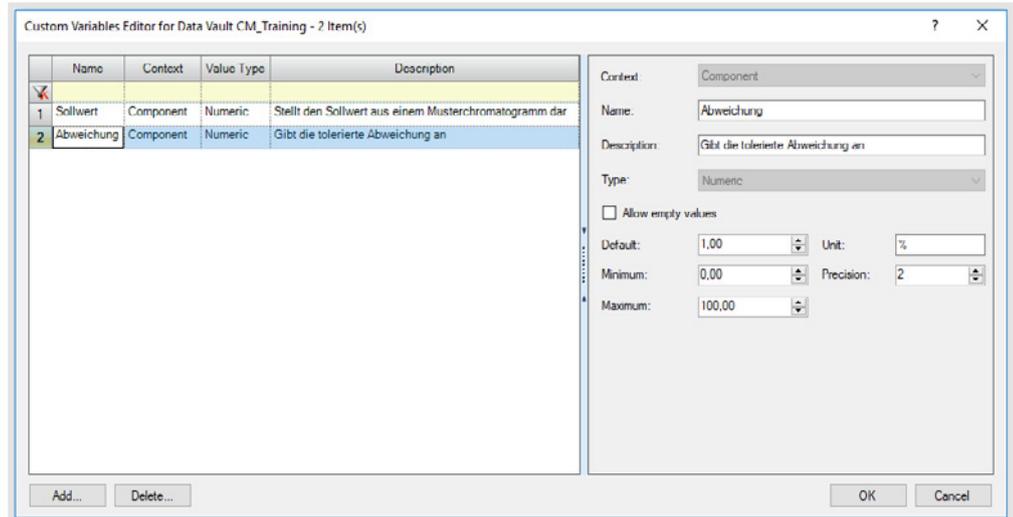


Abbildung 2: Übersicht über Custom Variables im Custom Variables Editor.

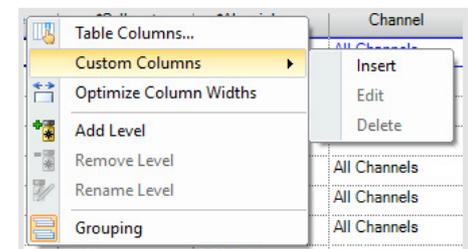


Abbildung 3: Einfügen einer Custom Column in der Komponententabelle der Processing Method.

Die angelegten Custom Variables können nun, wie in Abbildung 3 dargestellt, in die Component Table der Processing Method importiert werden. Jeder Nutzer mit dem Privileg, die Processing Method zu ändern, erhält so die Möglichkeit, Sollwerte und tolerierte Abweichungen in den neuen Spalten zu hinterlegen (Abbildung 4).

Mit Ausführung dieser Schritte sind die Variablen in der Processing Method hinterlegt und es ist bereits möglich Werte einzutragen. Als nächstes muss die mathematische Berechnung der tatsächlichen Abweichung erfolgen, die dann im letzten Schritt mit der hinterlegten Abweichung (Abbildung 4) verglichen und beurteilt werden kann.

*Sollwert	*Abweichung
0,120	3,00 [%]
0,219	3,00 [%]
0,263	3,00 [%]
0,218	3,00 [%]
0,200	3,00 [%]
0,173	3,00 [%]
0,166	3,00 [%]
0,169	3,00 [%]
0,144	3,00 [%]
0,125	3,00 [%]

Abbildung 4: Beispielhafte Einträge in den Spalten der Custom Variables.

#4: ERSTELLEN DER CUSTOM FORMULA

Um festzustellen, inwieweit die gemessenen Ergebnisse (Peakflächen) vom Sollwert abweichen, muss im Report Designer des Chromeleon™ Studios die folgende Formel erstellt werden:

$$\text{Ergebnisabweichung} = 100 \times \frac{(\text{Peakfläche} - \text{Sollwert})}{\text{Sollwert}}$$

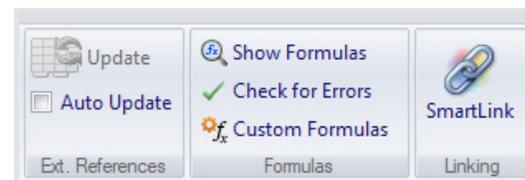


Abbildung 5: Custom Formulas Button im Report Designer.

In der Menüleiste des Report Designers wird im Abschnitt Home über Custom Formulas (Abbildung 5) der Custom Formulas Manager geöffnet. Durch Klick auf Add kann dann eine neue Custom Formula erstellt werden.

Die Custom Formula zur Berechnung der Ergebnisabweichung ist in Abbildung 6 dargestellt. Dabei werden die folgenden Report-Variablen verwendet:

- ▶ peak.area (Chromeleon Variable, die die Peakfläche des entsprechenden Peaks ausgibt)
- ▶ component.customVar(„Sollwert“) (Eigene Variable, die den Wert ausliest, den der Nutzer (Abbildung 4) hinterlegt hat)

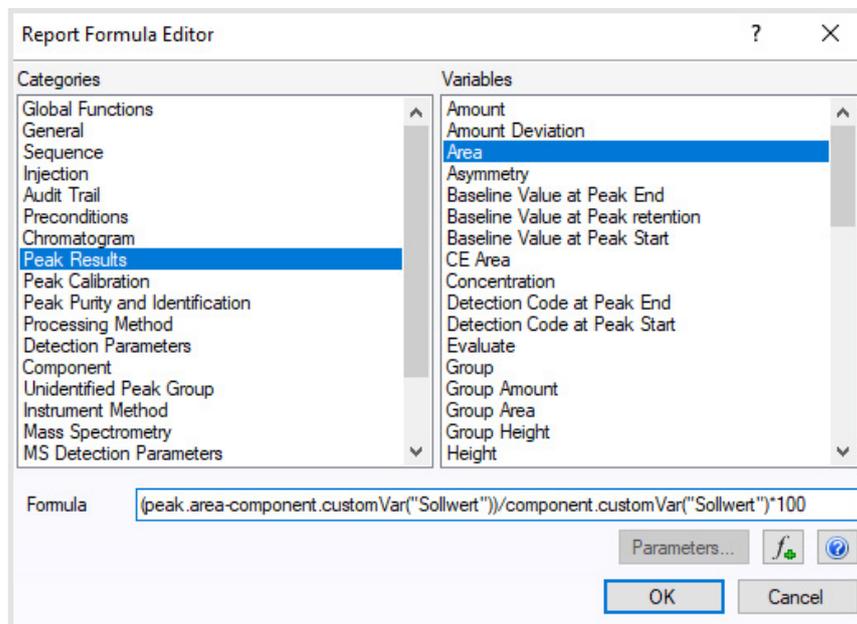


Abbildung 6: Custom Formula zur Berechnung der Ergebnisabweichung (in %).

#5: ERGEBISAUSGABE MIT BEURTEILUNG

Im nächsten Schritt soll die Ergebnisabweichung in einer dynamischen Tabelle angezeigt werden. Dazu wird über „Insert“ → „All Tables“ eine Integration Table in den Report eingefügt. Hier können Spalteninhalte durch Doppelklick auf die jeweilige Spaltenüberschrift geändert werden. In unserem Beispiel ist in Abbildung 7 in Spalte F die Ergebnisabweichung (in %), berechnet durch die Custom Formula, hinterlegt, die sich dabei auf die in Spalte E dargestellte Peakfläche bezieht.

Neben der Ausgabe der Ergebnisabweichung war eine weitere Anforderung an das Report Template, eine eindeutige Bewertung in Bezug auf eine gegebene Toleranz anzugeben.

Dazu wird in der Integration Table des Report Templates eine weitere Spalte eingefügt. Diese enthält eine bedingte if-Abfrage (Abbildung 8), die folgendes besagt:

Ist der Betrag der Ergebnisabweichung kleiner als die erlaubte Abweichung, schreibe „OK“.

Ist der Betrag der Ergebnisabweichung größer als die erlaubte Abweichung, schreibe „OOS“.

In Abbildung 9 ist das Ergebnis der Beurteilung der Injektion angezeigt, aus der die Peakflächen in die Sollwert-Spalte der Component Table übertragen wurden. Die resultierenden geringen Abweichungen sind auf Rundungsfehler zurückzuführen. Wären keine Spezifikationsgrenzen angegeben oder ist der gemessene Peak nicht als Komponente identifiziert, wird der Wert „n.a.“ angezeigt (Abbildung 9 Peak 10).

	A	B	C	D	E	F
1						
2		No.	Peak Name	Retention Time min	Area mAU*min	Deviation %
3						
5		1	Uracil	0,022	0,120	-0,13
6		2	Acetanilide	0,031	0,219	-0,18
7		3	Acetophenone	0,044	0,263	0,04
8		4	Propriophenone	0,061	0,218	0,17
9		5	Butyrophenone	0,088	0,200	-0,11
10		6	Benzophenone	0,100	0,173	-0,16
11		7	Valerophenone	0,121	0,166	0,17
12		8	Hexanophenone	0,146	0,169	-0,12
13		9	Heptanophenone	0,164	0,144	-0,11
14		10		0,177	0,125	n.a.

Abbildung 7: Integration Table im Report Template mit eingefügter Custom Formula (Spalte F „Deviation“).

Properties Integration Table

<p>Table Channels</p> <p>Filter Peaks</p> <p>Grouping Options</p> <p>Report Column</p> <p>Header Rows</p> <p>SmartLink</p>	<p>Report Column</p> <p>Column Management</p> <p> <input type="button" value="Add"/> <input type="button" value="Delete"/> <input type="button" value="Refresh"/> </p> <p>Column Properties</p> <p>Formula</p> <p>f(abs(cf.Ergebnisabweichung)<component.customVar("Abweichung"));"OK";"OOS")</p>
---	---

Abbildung 8: Bedingte if-Abfrage zur Ergebnisbewertung als „OK“ oder „OOS“ in Integration Table.

	A	B	C	D	E	F	I
1							
2		No.	Peak Name	Retention Time min	Area mAU*min	Deviation %	Absolut
3							
5		1	Uracil	0,022	0,120	-0,13	OK
6		2	Acetanilide	0,031	0,219	-0,18	OK
7		3	Acetophenone	0,044	0,263	0,04	OK
8		4	Propriophenone	0,061	0,218	0,17	OK
9		5	Butyrophenone	0,088	0,200	-0,11	OK
10		6	Benzophenone	0,100	0,173	-0,16	OK
11		7	Valerophenone	0,121	0,166	0,17	OK
12		8	Hexanophenone	0,146	0,169	-0,12	OK
13		9	Heptanophenone	0,164	0,144	-0,11	OK
14		10		0,177	0,125	n.a.	n.a.

Abbildung 9: Bewertung des Ergebnisses (Spalte I) einer Injektion mit durchweg kleinen Abweichungen.

In Abbildung 10 sind die Ergebnisse einer anderen Injektion dargestellt. In dieser Injektion gibt es drei Peaks, die eine Abweichung größer einem Betrag von 3% aufweisen. An diesem Beispiel wird deutlich, wie wichtig die Berücksichtigung des Betrags war, da die Abweichung -3,15% andernfalls als OK ausgegeben würde, da die Abweichung kleiner +3% ist.

Neben der reinen Darstellung der Ergebnisbeurteilung ist es in Chromeleon™ zusätzlich möglich, das ausgegebene Ergebnis farblich hervorzuheben. Im Beispiel in Abbildung 11 ist für die negative Beurteilung des Ergebnisses („OOS“) eine rote Schriftfarbe hinterlegt, für eine positive Ergebnisbeurteilung („OK“) eine grüne. War keine Beurteilung möglich, so bleibt der Wert „n.a.“ in schwarzer Farbe.

	A	B	C	D	E	F	I
1							
2		No.	Peak Name	Retention Time	Area	Deviation	Absolut
3				min	mAU*min	%	
5		1	Uracil	0,022	0,128	6,91	OOS
6		2	Acetanilide	0,030	0,227	3,73	OOS
7		3	Acetophenone	0,043	0,267	1,50	OK
8		4	Propriophenone	0,061	0,222	1,97	OK
9		5	Butyrophenone	0,088	0,201	0,35	OK
10		6	Benzophenone	0,100	0,174	0,47	OK
11		7	Valerophenone	0,120	0,165	-0,57	OK
12		8	Hexanophenone	0,146	0,164	-3,15	OOS
13		9	Heptanophenone	0,163	0,143	-0,78	OK
14		10		0,177	0,125	n.a.	n.a.

Abbildung 10: Bewertung des Ergebnisses (Spalte I) einer Injektion mit größeren Abweichungen.

	A	B	C	D	E	F	K
1							
2		No.	Peak Name	Retention Time	Area	Deviation	Bewertung
3				min	mAU*min	%	
5		1	Uracil	0,022	0,128	6,91	OOS
6		2	Acetanilide	0,030	0,227	3,73	OOS
7		3	Acetophenone	0,043	0,267	1,50	OK
8		4	Propriophenone	0,061	0,222	1,97	OK
9		5	Butyrophenone	0,088	0,201	0,35	OK
10		6	Benzophenone	0,100	0,174	0,47	OK
11		7	Valerophenone	0,120	0,165	-0,57	OK
12		8	Hexanophenone	0,146	0,164	-3,15	OOS
13		9	Heptanophenone	0,163	0,143	-0,78	OK
14		10		0,177	0,125	n.a.	n.a.

Abbildung 11: Bewertung der Ergebnisse mit zusätzlich hinterlegter bedingter Formatierung.



Qpliance GmbH

Marie-Curie-Str. 3 | 14656 Brieselang

Tel.: +49 (0) 3 32 32 46 47 43

Mobil: +49 (0) 163 2 04 49 22

info@qpliance.com

www.qpliance.com